

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛОКАЛЬНОЙ ПОДВИЖНОСТИ В МЕТАКРИЛОВЫХ ХРОМОФОР-СОДЕРЖАЩИХ ОЛИГОМЕРАХ РАЗВЕТВЛЕННОГО СТРОЕНИЯ<sup>1</sup>

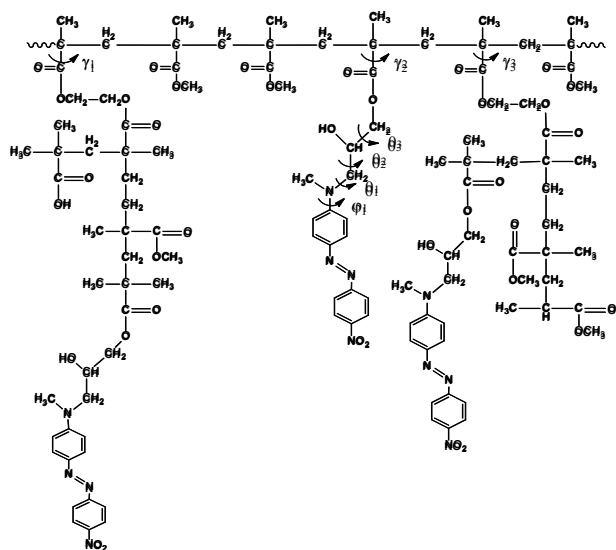
Шарипова А.В.<sup>a</sup>, Фоминых О.Д.<sup>a</sup>, Никонорова Н.А.<sup>b</sup>, Балакина М.Ю.<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН, 420088, г. Казань, ул. Ак. Арбузова, 8*

<sup>b</sup> *Институт высокомолекулярных соединений РАН, 199004, г. Санкт-Петербург, Большой проспект, 31*

*a.v.sharipova@yandex.ru*

Методами молекулярного моделирования (программа MacroModel) исследована локальная подвижность хромофоров и участков цепи в модельных разветвленных метакриловых олигомерах с азохромоформными группами [1]. Определен набор уникальных конформаций исследованных молекулярных



систем с разным содержанием хромофоров. Методом молекулярной динамики исследована подвижность полярных групп в отобранных конформерах при температурах релаксационных процессов, установленных методом Диэлектрической спектроскопии. Установлено, что подвижность азохромофоров

реализуется при температуре, превышающей температуру, при которой начинается сегментальная подвижность цепей олигомера.

1. Т. А. Vakhonina, М. Ю. Balakina, G.N. Nazmieva, et al, *Eur. Polym. J.*, 2014, **50**, 158.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Президиума РАН №8.